机器学习仿真中能重离子碰撞的集体流与核阻止本领

魏国俊 [1,2] 王永佳 [2*]，李庆峰 [2*]，刘福虎 [1]
1（山西大学 理论物理研究所 太原 030006）
2（湖州师范学院 理学院 湖州 313000）

摘要 重离子碰撞实验结合输运模型模拟是提取核物质性质信息的重要手段之一。贝叶斯分析是一种能够从实验数据与理论计算的比较中提取信息的统计方法，因而被广泛应用。这一过程中通常需要使用马尔可夫链蒙特卡罗方法在参数空间采样，然后进行输运模型模拟计算。然而，由于输运模型的计算比较复杂而且十分耗时，因此为了加速这一过程，需要通过机器学习算法训练一个输运模型仿真器。本文选用了高斯过程、多任务神经网络和随机森林三种机器学习算法来训练极端相对论量子分子动力学（UrQMD）输运模型仿真器。在与核物质性质相关的三个参数先验分布范围内选取了 150 组参数的结果作为训练集，通过 UrQMD 输运模型模拟这些参数下：入射能量为每核子 0.25 GeV 的金金碰撞，从末态粒子信息中提取自由质子的直接流、椭圆流和核阻止本领等观测量，另外随机选取 20 组参数的结果作为测试集对仿真器的效果进行检验。结果显示，高斯过程、多任务神经网络和随机森林三种算法在测试集上预测结果的决定系数 R^2 分别为 0.95、0.93 和 0.85，表明高斯过程和多任务神经网络在模拟输运模型计算的观测量时都表现出较高的准确性，能够有效地加速输运模型的计算过程。

关键词 重离子碰撞；核物质状态方程；输运模型；机器学习；仿真器
中图分类号 O571.53

Machine Learning Simulates Collective Flow and Nuclear Stopping in Heavy-ion Collisions at Intermediate Energies

Guojun Wei[1,2] Yongjia Wang[2] Qingfeng Li[2] Fuhu Liu[1]
1(*Institute of Theoretical Physics, Shanxi University, Taiyuan 030006, China*)
2(*School of Science, Huzhou University, Huzhou 313000, China*)

Abstract **[Background]**: The nuclear equation of state (EoS) delineates the thermodynamic relationship between nucleon energy and nuclear matter density, temperature, and isospin asymmetry. This relationship is crucial for validating existing nuclear theoretical models, investigating the nature of nuclear forces, and understanding the structure of compact stars, neutron star mergers, and related astrophysical processes. Heavy-ion collision experiments combined with transport models is a critical way to explore the high-density behavior of EoS. With the rapid advancement of a new generation of high-current heavy-ion accelerators and the development of efficient detection technologies, the variety, volume, and precision of data generated from heavy-ion collision experiments have seen substantial enhancements. The effective utilization and analysis of these experimental datasets to extract crucial

基金名称项目(批准文号) 资助
第一作者：XXX，男女，19XX 年出生，20XX 年于 XX 大学获博士学位，研究领域
通讯作者：XXX，E-mail:
收稿日期：20XX-00-00，修回日期：20XX-00-00

information about the EoS have emerged as one of the central challenges in contemporary heavy-ion physics research. Bayesian analysis is a statistical method, which can extract reliable physical information by comparing experimental data with theoretical calculations, and can quantify the uncertainty of parameters, so it has been widely concerned. In the task of determining the range of parameters of EoS by Bayesian inference. The Monte Carlo sampling method is used to extract observables from the final state particle information simulated by transport model in each set of EoS parameters. Since the calculation process of transport model is complex, this step will consume a lot of time. This complexity significantly hinders the efficiency of data generation and limits the ability to explore the full parameter space. **[Purpose]**: To address this challenge, there is a pressing need for a more efficient approach to simulate transport models, particularly one that leverages modern computational techniques to accelerate the process. **[Methods]**: Here, we propose a machine learning-based approach to develop a transport model emulator that can significantly reduce calculated time. We evaluate three machine learning algorithms—Gaussian processes, Multi-task neural networks and random forests—to train emulators based on the ultra-relativistic quantum molecular dynamics (UrQMD) transport model. The selected observables are protons' directed flow, elliptical flow and nuclear stopping extracted from the final state of the Au+Au collision at E_{lab} = 0.25 GeV/nucleon in different EoS parameters (incompressibility K_0, effective mass m* and in-medium correction factor F of nucleon-nucleon elastic cross section). 150 parameter sets of the UrQMD model with K_0 = 180, 220, 260, 300, 340, 380 MeV, m*/m = 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 0.95 and F = 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0 are run. For each case, 2×10^5 events with the reduced impact parameter b_0<0.45 are simulated in order to make sure that the statistical errors are negligible. The results from the calculations with the above mention 150 parameter sets are fed to three machine learning algorithm to train the emulators. In addition, 20 parameter sets of the UrQMD model with randomly chosen K_0, m*, and F are run and the results on observables are used to test the performance of the emulators. **[Results]**: The results obtained from Gauss processes and multi-task neural networks are in line with the one calculated by UrQMD model, indicating that the two emulators has a high accuracy and can be used during the Bayesian analysis. However, when predicting v_{11} and v_{20} with reduced impact parameter b_0 < 0.25, some data points predicted by random forest have large errors, indicating that the random forest as a transport model emulator is relatively poor in predicting the observables. In order to further compare the prediction effect of the three transport model emulators, we choose the coefficient of determination R^2 as the evaluation index. The R^2 of Gaussian process, multi-task neural network and random forest in the test set are 0.95, 0.93, and 0.85, respectively. These results show that both Gaussian process and multi-task neural network show high accuracy when simulating the data of UrQMD model, and can effectively accelerate the calculation process. However, for complex tasks with a large number of parameters and observables, the efficiency and accuracy of Gaussian processes emulator may suffer. Thus, relying solely on Gaussian processes may not suffice. In this case, multi-task neural networks show greater adaptability, is better able to handle complex data sets and effectively learn information within parameter spaces. **[Conclusions]**: To sum up, Gaussian processes generally perform well in Bayesian frameworks as the choice of a transport model emulator, especially for moderate data sets, while multi-task neural networks may be a more ideal choice for complex tasks with more parameters and observables. In practical application, the more suitable emulator should be selected according to the specific task requirements and data characteristics.

Key words Heavy-ion collisions, Nuclear equation of state, Transport model, Machine learning, Emulator

核物质状态方程（EoS）表征的是核子能量与核物质密度、温度、同位旋不对称度之间的热力学关系，它的信息对检验现有核理论模型、探究核力本质以及致密星体结构、中子星并合等过程都有重要意义。重离子碰撞（重离子碰撞）实验结合输运模型是研究 EoS 的主要手段之一。传统方法通常利用输运模型模拟重离子碰撞过程，计算集体流、核阻止等观测量并与实验数据对比，从而提取描述 EoS 的参数。然而，随着新一代高流强重离子加速器和高效探测技术的快速发展，重离子碰撞实验所能提供的数据类型和数据量

激增[1-7]，传统方法面临两大挑战：输运模型的计算复杂度导致单次模拟耗时长达数小时，难以在高维参数空间中高效探索；实验数据的不确定性与模型本身的系统误差叠加，使得参数后验分布的收敛性难以保证。

贝叶斯分析是一种统计方法，能够从大量实验数据与理论计算的比较中提取可靠的物理信息，而且能够对参数的不确定性进行量化。贝叶斯分析在重离子物理中已被广泛应用。如文献[8]基于质心能量为2.24-8.86 GeV 范围内的实验数据，利用贝叶斯分析研究了致密物质在 2-4 倍饱和密度范围内的 EoS；文献[9]结合 SπRIT 实验数据和改进的量子分子动力学模型，使用贝叶斯分析对 EoS 的参数进行约束，发现集体流和核阻止是对质子和中子有效质量劈裂和介质截面敏感的观测量，具有较强的约束性。

在贝叶斯分析中，马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）方法常用于抽取各个参数的后验分布。然而，由于输运模型本身较为复杂，模拟重离子碰撞过程的计算非常耗时，导致抽样过程的实现困难。仿真器作为解决上述问题的关键技术，具有提升计算效率、量化不确定性以及挖掘高维特征的优势。它能够通过机器学习算法对输运模型的计算结果进行快速插值或外推，将原本耗时的物理模拟转化为秒级预测，从而显著加速贝叶斯分析流程[10-14]。仿真器作为一种通过数学建模或机器学习技术快速模拟复杂物理过程的工具，由统计学家和机器学习研究者在 21 世纪初系统提出[15]。在核物理领域，以高斯过程（GP）为代表的模型仿真器一直是重离子从低能量至相对论能量的贝叶斯分析中模型-数据比较的标准模拟技术之一，但依然存在一些限制：高斯过程在小样本下表现优异，但大规模参数空间中计算成本剧增；重离子碰撞中直接流、椭圆流等观测量存在内在耦合，需联合建模以提升约束能力。因此，针对这些问题开发多种更高效、更准确的输运模型仿真器，以量化描述重离子反应中核物质状态方程参数的不确定性是十分必要的。在近期的一篇文献[16]中，通过使用深度神经网络（DNN）模拟 IBUU（Isospin-dependent Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck）仿真器，在一个小的数据集中从对质子的直接流和椭圆流进行预测，发现其精度大约是高斯过程的 10 倍，说明使用其它机器学习算法作为高斯过程仿真器的替代是可行的。

机器学习的各种算法已被广泛用以在重离子碰撞数据中提取更多的物理信息[17-24]。例如，文献[25-27]使用卷积神经网络（CNN）、轻量级梯度提升机（LightGBM）、随机森林（RF）等多种算法通过输运模型生成的特征量来确定碰撞参数，结果表明这些机器学习算法可以可靠地用于重构实验中的碰撞参数；文献[28]使用 UrQMD 模型模拟逐事件的重离子碰撞，用生成的数据通过 LightGBM 算法进行训练，能够预测对称能斜率参数，平均绝对误差接近 30 MeV；文献[29]构建了一个动态边缘卷积+点云神经网络来识别重离子碰撞实验数据中的弱间歇信号，这些结果都说明机器学习的多种算法是生成或模拟物理事件有效的工具。

本文选择了高斯过程、多任务神经网络和随机森林三种机器学习算法，结合极端相对论量子分子动力学(ultra-relativistic quantum molecular dynamics, UrQMD)模型模拟不同 EoS 参数下的重离子反应，预测直接流、椭圆流和核阻止本领，并比较三种输运模型仿真器的预测结果。

1 UrQMD 输运模型与重离子碰撞数据

1.1 UrQMD 输运模型

极端相对论量子分子动力学(ultra-relativistic quantum molecular dynamics, UrQMD)模型是一种多体微观输运模型，主要包括弹靶核初始化、平均场、碰撞项、碎片构建几个部分。在模型中每个核子由一个具有确定宽度的高斯型波包表示[30-32]：

$$\varphi_i(\vec{r};t)=\frac{1}{(2\pi\sigma_r^2)^{4/3}}exp[-\frac{(\vec{r}-\vec{r}_i(t))^2}{4\sigma_r^2}+\frac{i\vec{p}_i(t)\cdot\vec{r}_i}{\hbar}].$$

核子的坐标、动量是在满足一定的条件下，通过随机的方式抽取。坐标的范围是从 0 到原子核的半径 R，动量的范围是从 0 到局域的费米动量$p_f=\hbar(3\pi^2\rho/2)^{1/3}$。此外，还考虑了质子和中子的区别以及其它一些约束条件。

初始化完成后，重离子碰撞在平均场和碰撞项的共同作用下进行演化，第i个核子波包中心的坐标 $\vec{r}_i(t)$ 和 $\vec{p}_i(t)$ 的演化遵循以下方程：

$$\vec{r}_i(t)=\frac{\partial H}{\partial\vec{p}_i(t)},\ \vec{p}_i(t)=-\frac{\partial H}{\partial\vec{r}_i(t)}.$$

式中H为系统的总哈密顿函数，由动能和势能组成。核子势能U是由势能密度计算出来的[33-35]，即$U=\int ud^3r$。u 可以写为：

$$u=\frac{\alpha}{2}\frac{\rho^2}{\rho_0}+\frac{\beta}{\gamma+1}\frac{\rho^{\gamma+1}}{\rho_0^{\gamma}}+\frac{g_{sur}}{2\rho_0}(\nabla\rho)^2+\frac{g_{sur,iso}}{\rho_0}[\nabla(\rho_n-\rho_p)]+u_{sym}+u_{md},$$

参数α、β和γ与两体、三体相互作用项有关。表面项和表面不对称项分别为g_{sur} = 19.5 MeV fm^{2}和$g_{sur,iso}$ = -11.3 MeV fm^2。u_{sym}是核对称能项，在本工作中使用的是取自 Skyrme 的 MSL0，参数为 A = 36.4 MeV，B = -15.1 MeV，C = -3.5 MeV，γ_s = 1.2359。对称能的斜率参数 L 为 60MeV。u_{md}来自于动量依赖项：

$$u_{md}=\sum_{ij}\int d^3p_id^3p_jf_i(\vec{r},\vec{p}_i)f_j(\vec{r},\vec{p}_j)\cdot t_{md}ln^2[1+a_{md}(\vec{p_i}-\vec{p_j})^2],$$

t_{md}和a_{md}与动量依赖项有关。

对于零温同位旋对称核物质，结合能$\mathrm{E_0(\rho)}$可以表示为：

$$\mathrm{E_0(\rho)}=\frac{3\hbar^2}{10\mathrm{m}}\cdot(\frac{3\pi^2}{2})^{2/3}\cdot\rho^{2/3}+\frac{\alpha}{2}\cdot\frac{\rho}{\rho_0}+\frac{\beta}{\gamma+1}\cdot\frac{\rho^{\gamma}}{\rho_0^{\gamma}}+\frac{\mathrm{v_{mom}}}{\rho},$$

动量相关项的贡献可以写为：

$$\frac{\mathrm{v_{mom}}}{\rho}=\frac{1}{\rho}\iint t_{md}ln^2[1+a_{md}(\vec{p_i}-\vec{p_j})^2]\cdot f_i(\vec{r},\vec{p}_i)f_j(\vec{r},\vec{p}_j)d\,\vec{p}_id\vec{p}_j.$$

1.2 重离子碰撞数据

通过 UrQMD 输运模型模拟重离子碰撞，从粒子动量信息中提取观测量与实验数据对比是研究重离子反应的一个重要途径。集体流是研究重离子反应中的一个重要的观测量数据，它描述了重离子碰撞中产生的粒子的集体运动。重离子碰撞初始时，粒子只有（x 轴和 y 轴方向有很小的费米动量）沿着 z 轴方向的动量，随着反应的进行，粒子之间随机相互碰撞，热密物质膨胀，就会导致粒子有与 z 方向相当的沿 x 和 y 轴的动量，形成在反应平面内的集体运动，称为集体流[36-40]。它与碰撞动力学的时空演化以及核物质的状态方程密切相关，是探究核物质性质的重要工具，对于研究大范围能量的重离子碰撞中的许多课题具有重要意义。

其中，直接流和椭圆流是最常用的两个观测流。直接流反映的是粒子在反应平面出射的效应，可以由粒子的方位分布的傅里叶展开得到：

$$v_1=\langle cos(\varphi)\rangle=\langle\frac{p_x}{p_t}\rangle.$$

在碰撞过程中被挤压的物质膨胀时受到旁观者的阻止，就会沿着 y 轴的方向挤出，称为椭圆流，反映的是粒子沿着出射平面挤出的效应，定义为：

$$v_2=\langle cos(2\varphi)\rangle=\langle\frac{p_x^2-p_y^2}{p_t^2}\rangle.$$

v_1和v_2随约化快度y_0的分布分别可以用$v_1=v_{11}\cdot y_0+v_{13}\cdot y_0^3$和$v_2=v_{20}+v_{22}\cdot y_0^2+v_{24}\cdot y_0^4$进行拟合。通常我们关心直接流在中心快度区的斜率$v_{11}$和椭圆流在$y_0=0$ 处的值v_{20}。

除了集体流以外，核阻止本领是重离子碰撞中另一个重要的观测量，描述的是纵向的束流能量转换为横向的效率。$vartl$是一个常用的表示核阻止能力的观测量，定义为粒子速度沿横向分布的方差与纵向速度分布的方差之比[41-44]：

$$vartl=\frac{\langle y_x^2\rangle}{\langle y_z^2\rangle}=\frac{\sum N_x y_x^2}{\sum N_x}/\frac{\sum N_z y_z^2}{\sum N_z}.$$

其中，$\mathrm{y_x^2}$和$\mathrm{y_z^2}$分别是粒子在 x 方向和 z 方向上的快度分布的方差，N_x和N_z为相应快度区间内的粒子数。

2　机器学习算法介绍

2.1　高斯过程

在机器学习领域里，高斯过程是一种通过定义在输入空间上的概率分布，有效地捕捉数据中的不确定性和复杂模式的有监督建模方式。无论是回归或者分类预测都以高斯分布标准差的方式给出预测置信区间估计。

高斯过程回归的基本原理是通过定义高斯过程的均值函数$m(x)$和协方差函数$k(x,x')$来构建模型，即：$f(x)\sim GP(m(x),k(x,x'))$。常用的协方差函数为径向基函数（RBF）核，定义了任意两个输入点x和x'之间的相关性，其解析形式为$k(x,x')=exp(-|x-x'|^2/2l^2)$，其中$l$为超参数，表示其带宽和特征长度尺度。在训练阶段，通过给定的数据集$D\{(x_i,y_i)\}_{i=1}^N$，x_i为输入，y_i为输出，观测噪声ϵ独立同分布且服从均值为 0、方差为σ^2的正态分布）计算协方差矩阵K和均值函数 m(x)来估计模型的超参数；在预测阶段，对于新的输入 x^*，使用高斯过程对其输出进行预测，得到预测均值$\mu_*=k_*^T K^{-1}y$和不确定性（方差$\sigma_*^2=k(x_*,x_*)-k_*^T K^{-1}\mathrm{k}$）。其中，$K_{ij}=k(x_i,x_j)$，$y$是观测输出向量，$k_*$是新输入点$x_*$与已有数据点的协方差向量[45-47]。高斯过程模型的性能在很大程度上依赖于协方差函数中的超参数，通常通过最大化边际似然函数来学习这些超参数，通过梯度下降等优化方法，可以有效地寻找使边际似然最大的超参数组合。高斯过程的实现通常可使用 GPy 或 scikit-learn 库。

高斯过程在许多场景中具有独特的优势。首先，高斯过程通过基于训练数据的协方差矩阵来进行预测，这使得它在数据量较少时，仍能进行合理的推断，即使在样本较为稀缺的情况下，高斯过程也能生成具有较高质量的预测数据；其次，在处理复杂且未知的非线性关系时，高斯过程可以通过选择合适的协方差函数来灵活地适应数据的潜在结构，且能够提供每个预测点的置信度；此外，高斯过程的预测不仅是点估计，还有方差估计，这为理解模型的行为提供了清晰的依据。

2.2　神经网络

神经网络作为人工智能和机器学习领域的核心技术，模拟了生物神经元工作机制的结构和功能，具有强大的模式识别和非线性映射能力。它由一组相互连接的节点（或称为“神经元”）组成。这些神经元通过连接构成网络层，数据在神经网络中通过各层进行传播和变换，最终输出结果[48-49]。

神经网络的基本结构包括输入层、隐藏层和输出层。输入层接收外部数据输入，每个节点对应输入数据的一个特征x_i；隐藏层位于输入层和输出层之间，可以有一个或多个隐藏层。隐藏层的数量和每层的神经元数量决定了网络的容量和表达能力；输出层生成最终的预测结果y_i，其结构根据具体任务（如分类或回归）而定。每个神经元与前一层的所有神经元相连接并接收其输入值，得到一个加权和 z，连接强度由权重w_i和偏置b确定，即 $\mathrm{z}=\sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{n}} w_i x_i+b$。然后，这个加权和通过一个非线性激活函数 f 进行处理，得到该神经元的输出 y = f(z)。激活函数的作用是引入非线性，让神经网络能够处理复杂的非线性关系。常用的激活函数包括 Sigmoid、Tanh 和 ReLU 等。

神经网络的训练旨在通过调整权重和偏置，寻找一个最合适的目标函数$f(x_i,\theta)$, θ代表目标函数的参数。神经网络的训练通常依赖于反向传播算法，该算法通过链式法则计算损失函数相对于各层参数的梯度并将误差反向传播，用梯度下降法逐层调整网络的权重（参数θ），以减少输出结果与目标值之间的误差。损失函数则用于衡量神经网络输出（预测值）与实际目标值之间的差异[50-53]。常用的梯度下降算法有 SGD、Adagrad、RMSProp、Adam 等。常见的损失函数有均方误差（MSE）用于回归任务，交叉熵损失用于分类任务。

随着计算能力的提升和大规模数据集的出现，深度神经网络（Deep Neural Networks, DNNs）逐渐成为

主流。深度网络通过增加隐藏层的数量，显著提升了模型的表达能力。常见的神经网络类型有人工神经网络（Artificial Neural Networks, ANN）、循环神经网络（Recurrent Neural Networks, RNN）和卷积神经网络（Convolutional Neural Networks, CNN）等。各种类型的神经网络均可通过 PyTorch、TensorFlow、Keras、sklearn 等库进行建模。

2.3 决策树

决策树是一种基于树状结构的分类与回归模型。其主要思想是通过一系列的决策规则（根据特征值划分数据集）来对数据进行分类或回归。决策树通过递归地分割数据，选择每个节点的最佳分割特征，直到数据集被划分为最小的子集或达到预设的停止条件。

在决策树的构建过程中，通常使用信息增益来选择最佳的分裂特征。信息增益基于信息熵的概念，其优点在于其易于理解和可解释性强，适用于处理具有明确决策规则的数据。信息熵计算公式为$H(D)=-\sum_{i=1}^{n}p_i log_2 p_i$，其中，$n$是类别的数量，$p_i$是第$i$个类别的概率。信息增益的计算公式为$IG(D,A)=H(D)-\sum_{v=1}^{V}\frac{|D_v|}{|D|}H(D_v)$。其中$D$是数据集，$A$是特征，$V$是特征$A$的取值个数，$D_v$是特征$A$取值为$v$时对应的样本子集。然而，决策树也容易出现过拟合问题，尤其是在树的深度过大时。为了解决这个问题，常常采用剪枝技术对决策树进行优化[54]。

随机森林是由多个决策树组成的一个集成模型，它的核心思想是“集成学习”，即通过结合多个决策树的预测结果来提高整体性能。随机森林使用自助法对数据集进行随机采样，生成多个不同的训练集，对于每个采样生成的子集，随机森林构建一棵决策树。这意味着每棵决策树在训练时都使用的是原始数据集的不同子集。在构建树的过程中，每次节点分裂时，只从所有特征中随机选取一部分特征进行分裂。这增加了模型的多样性，减少了树与树之间的相关性。在预测过程，对于分类问题，随机森林通过对多个决策树的预测结果进行投票来确定最终的分类结果；对于回归问题，随机森林通过对多个决策树的预测结果进行平均来确定最终的预测值[55-56]。

3 结果与分析

本研究共选取了三个与核物质状态方程相关参数，分别是不可压缩系数 K_0、核子有效质量 m*和核子核子碰撞截面介质修正因子 F，先验分布见表 1。使用的观测量数据是入射能量为 0.25 GeV/nucleon 的 Au+Au 碰撞下产生的自由质子的v_{11}、v_{20}和$vartl$，见表 2。

高斯过程仿真器是利用已知的模拟数据或实验数据来拟合的一个高斯过程模型，能够预测新的输入点，常应用于贝叶斯分析中模型数据的生成和采样。共选取了 150 组参数数据作为高斯过程输运模型仿真器的训练集，20 组参数数据为测试集，通过高斯模拟和主成分分析，将 UrQMD 模型预测结果有效内插到参数集中。在代码中，使用了常数核函数 ConstantKernel 和径向基函数（RBF）的组合作为内核函数，二者的初始长度尺度均为 1，取值范围在 10^{-4}-1 之间。此外，为了找到最优的超参数组合，定义了一个超参数网格，通过网格搜索方法在指定的超参数网格中进行搜索，使用 5 倍交叉验证评估模型性能，找到最优的超参数组合。图 1 为训练好的高斯过程仿真器在测试集的预测结果。在图中，红色直线为 UrQMD 模型计算得到的观测量值的基准线，黑色五角星为仿真器计算的结果，即黑色五角星越靠近红色直线，说明仿真器的准确率越高。可以发现，仿真器预测的几乎所有数据点都分布在基准线的附近，偏离值也处于误差范围之内，说明仿真器的准确率较高，能够替代输运模型加速数据生成的过程。为了进一步证明仿真器的可靠性，我们计算了各个观测量之间的皮尔逊相关系数。在图 2 中，展示了观测量模型计算值与仿真器预测值的皮尔逊相关系数矩阵。可以看到，仿真器数据与模型数据观测量之间的相关性基本一致，说明仿真器确实学到了观测量数据内在关联的物理信息。

表 1 核物质性质的参数
Table 1 The parameters of the nuclear matter properties

参数	先验分布
不可压缩系数K_0	[180, 380]
有效质量m^*	[0.6, 0.95]
介质修正因子F	[0.6, 1.0]

表 2　选择的观测量
Table 2　Selection of observables

观测量		约化碰撞参数 b_0	横向动量 u_{t0}
Feature1	v_{11}	$b_0<0.25$	$u_{t0}>0.8$
Feature2		$0.25<b_0<0.45$	
Feature3	v_{20}	$b_0<0.25$	
Feature4		$0.25<b_0<0.45$	
Feature5	$vartl$	$b_0<0.15$	None

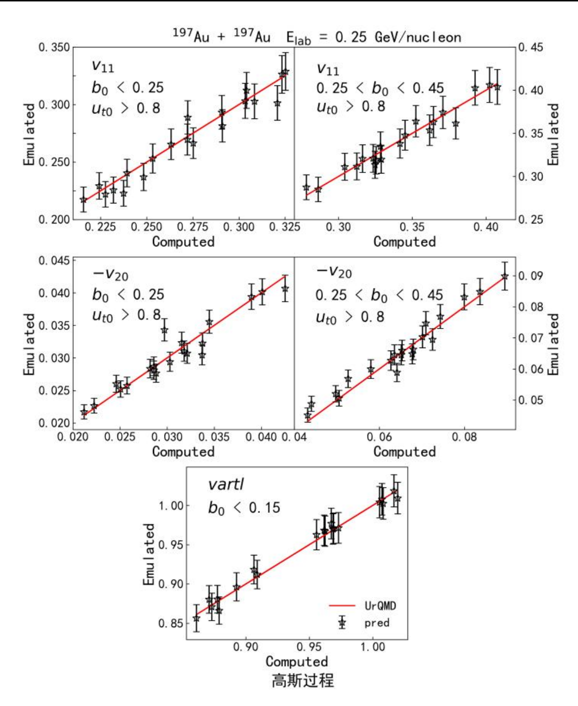


图 1　高斯过程仿真器得到的预测值与输运模型计算值的比较
Fig.1　Emulated vs computed for all observables considered. Successful emulation is clustered around y = x

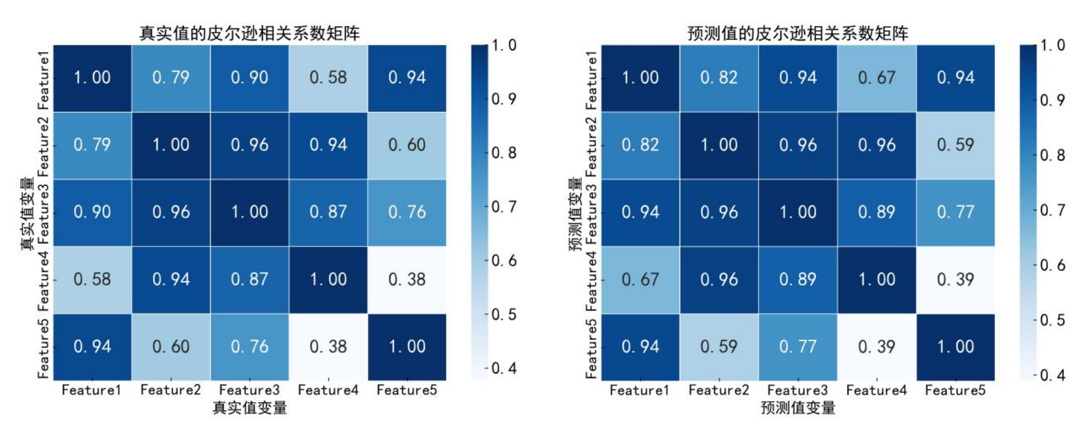


图 2　仿真器数据与模型数据的皮尔逊系数
Fig.2　The Pearson coefficient of the emulator data and the model data

此外，我们还使用了多任务神经网络和随机森林算法来作为输运模型仿真器。其中，多任务神经网络有一层隐藏层，共 50 个神经元，激活函数为 ReLU 函数，并通过 Adam 优化器进行参数更新；随机森林算法共生成 100 棵决策树，不限制树的最大深度，叶子节点所需的最小样本数为 2，拆分内部节点所需的最小样本数为 3。图 3 为其训练的输运模型仿真器的预测结果，可以看到，多任务神经网络的预测结果也基本处于误差范围之内，而随机森林在预测约化碰撞参数 $b_0 < 0.25$ 的 v_{11} 和 v_{20} 时，有多个数据点偏离基准线较大，说明随机森林作为输运模型仿真器预测观测量的效果相对较差。为了进一步比较三种仿真器的预测

效果，我们选择了决定系数 R^2作为评估指标，计算结果如表 3 所示。可以看到，随机森林在训练集上的表现优异，R^2高达 0.98，表明其在训练数据上拟合能力极强。然而，在测试集上，R^2仅为 0.85，显示出该模型可能存在过拟合。这主要是由于训练数据的稀疏性和有限性，随机森林在稀疏数据场景下的表现相对较差。相较之下，多任务神经网络和高斯过程的预测结果更加稳定，训练集和测试集的 R^2均相同，分别为 0.93 和 0.95，表明二者都能够从观测数据中有效地自动学习并提取有用的信息。然而，多任务神经网络的训练时间较长，这可能会成为其应用中的一个限制，而高斯过程的计算复杂度较高，在处理大规模数据集时需要消耗大量的计算资源，更适用于处理小规模数据集。

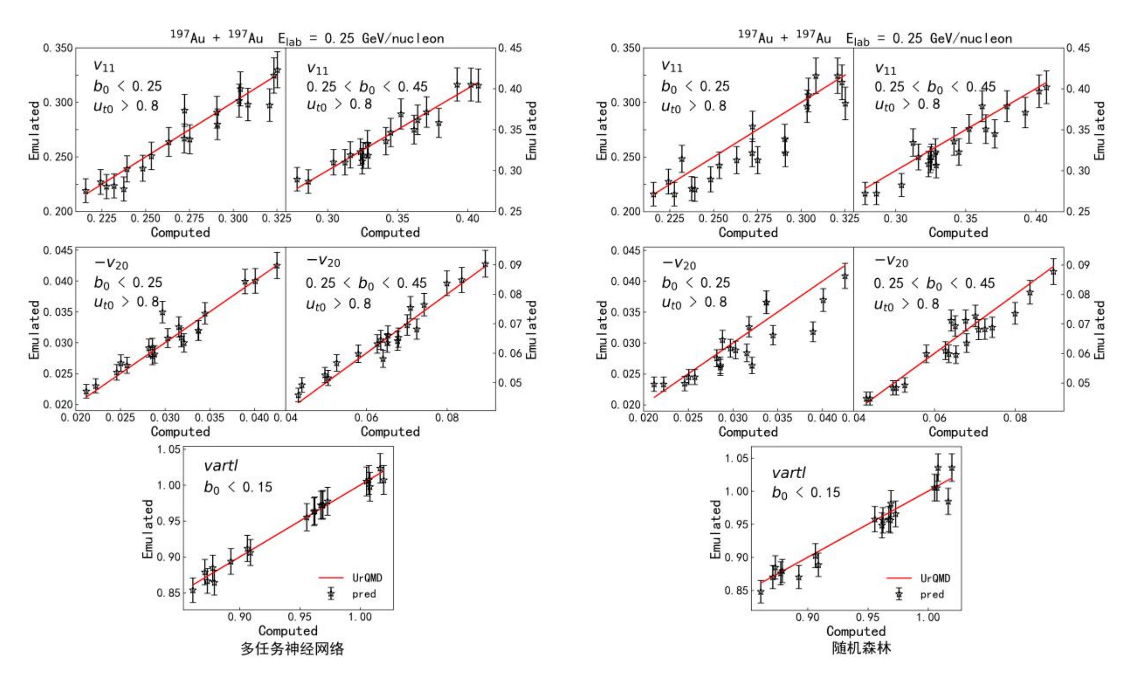


图 3　观测量仿真器预测值与输运模型计算值的比较

Fig.3　Emulated vs computed for all observables considered

表 3　输运模型仿真器校验结果

Table 3　Transport model emulator calibration results

机器学习	训练集 R^2	测试集 R^2
高斯过程	0.95	0.95
多任务神经网络	0.93	0.93
随机森林	0.98	0.85

综上所述，三种输运模型仿真器各有优缺点：随机森林尽管具有较强的拟合能力，但存在过拟合风险；多任务神经网络能够较好地捕捉复杂的非线性关系，但训练时间较长；高斯过程则具有较强的泛化能力，但计算资源消耗较大。在实际应用中，应根据具体的任务需求和数据特点选择合适的仿真器。通常情况，高斯过程已经能够适用于大多数参数和观测量数据较少的任务，而在一些需要大规模数据的场合，多任务神经网络则更加有效。训练好输运模型仿真器后，我们在统计上进行了严格的贝叶斯分析来提取表征核物质性质的参数的后验似然分布。结果显示，有效质量m^*和介质修正因子F可以被约束为高斯分布，但不可压缩系数K_0难以约束。

4　总结

本文对高斯过程、多任务神经网络和随机森林三种机器学习算法进行了比较，评估了它们作为 UrQMD 输运模型仿真器在预测重离子碰撞数据中的直接流、椭圆流和核阻止的表现。结果表明，尽管随机森林在训练集中的表现较为出色，但其在测试集中的预测准确度较低，且 R^2 明显低于高斯过程和多任务神经网络，说明其预测未知参数的观测量方面能力不足，无法有效替代传统的输运模型生成观测量数据。而高斯过程

和多任务神经网络在训练集和测试集中的预测结果较高且一致，说明二者均能作为输运模型仿真器。在实际应用中，高斯过程在贝叶斯框架中作为输运模型仿真器通常表现优异，特别是在数据量适中的情况下。然而，对于涉及大量参数和观测量的复杂任务，单纯依赖高斯过程可能无法满足需求。在这种情况下，多任务神经网络表现出了更强的适应性，能够更好地处理复杂的数据集。

输运模型仿真器结合实验数据，通过贝叶斯分析来约束核物质状态方程参数，可以同时考虑多个实验观测量，并给出相关参数的范围。下一步，我们将结合最新的重离子碰撞实验数据和输运模型计算模拟，对描述核物质状态方程的参数、核介质中核子-核子散射截面等进行约束。相关研究正在开展之中。

致谢 作者感谢 TMEP 小组成员的讨论，感谢湖州师范学院 C3S2 计算中心提供的大力支持，感谢国家自然科学基金(编号：12335008)、国家重点研发计划(编号：2023YFA1606402)、等离子体物理全国重点实验室基金(编号：6142A04230203)、浙江省教育厅科研项目(编号：Y202353782)以及湖州市自然科学基金(编号：2024YZ28) 资助项目。

参考文献

1 Sorensen A, Agarwal K, Brown K W, *et al*. Dense nuclear matter equation of state from heavy-ion collisions[J]. Progress in Particle and Nuclear Physics, 2024, 134: 104080.

2 Wang J M, Deng X G, Xie W J, *et al*. Bayesian inference of nuclear incompressibility from proton elliptic flow in central Au+Au collisions at 400 MeV/nucleon[J]. arxiv: preprint arxiv:2406.07051 (2024).

3 Wang Y J, Li Q F, Leifels Y, *et al*. Study of the nuclear symmetry energy from the rapidity-dependent elliptic flow in heavy-ion collisions around 1 GeV/nucleon regime[J]. Physics Letters B, 2020, 802: 135249.

4 Xu J. Transport approaches for the description of intermediate-energy heavy-ion collisions[J]. Progress in Particle and Nuclear Physics, 2019, 106: 312-359.

5 Li B A, Ko C M, Bauer W. Isospin physics in heavy-ion collisions at intermediate energies[J]. International Journal of Modern Physics E, 1998, 7(02): 147-229.

6 Li H L, Xu H J, Zhou Y, *et al*. Probing the neutron skin with ultrarelativistic isobaric collisions. Physical Review Letters, 2020, 125(22): 222301.

7 Xu H J, Li H L, Zhou Y, *et al*. Measuring neutron skin by grazing isobaric collisions. Physical Review C, 2022, 105(1): L011901.

8 Omana K M, Steinheimer J, Zhou K, *et al*. Qcd equation of state of dense nuclear matter from a bayesian analysis of heavy-ion collision data[J]. Physical Review Letters, 2023, 131(20): 202303.

9 Tsang C Y, Kurata-Nishimura, Tsang M B, *et al*. Constraining nucleon effective masses with flow and stopping observables from the SπRIT experiment[J]. Physics Letters B, 2024, 853: 138661.

10 Mäntysaari H, Schenke B, Shen C, *et al*. Bayesian inference of the fluctuating proton shape[J]. Physics Letters B, 2022, 833: 137348.

11 Fan W, Vujanovic G, Bass S A, *et al*. New metric improving Bayesian calibration of a multistage approach studying hadron and inclusive jet suppression[J]. Physical Review C, 2024, 109(6): 064903.

12 Everett D, Ke W, Paquet J F, *et al*. Multisystem Bayesian constraints on the transport coefficients of QCD matter[J]. Physical Review C, 2021, 103(5): 054904.

13 Zhou J, Xu J. Bayesian inference of neutron-skin thickness and neutron-star observables based on effective nuclear interactions. Science China Physics, Mechanics & Astronomy, 2024, 67(8): 282011.

14 Zhang Z, Chen L W. Bayesian inference of the symmetry energy and the neutron skin in ^{48}Ca and ^{208}Pb from CREX and PREX-2[J]. Physical Review C, 2023, 108(2): 024317.

15 Cox N, Grundler X, Li B A. Neural network emulation of flow in heavy-ion collisions at intermediate energies[J]. Physical Review C, 2024, 110(4): 044604.

16 Seeger, Matthias. Gaussian processes for machine learning[J]. International journal of neural systems, 2004, 14(02): 69-106.

17 Boehnlein A, Diefenthaler M, Sato N, *et al*. Colloquium: Machine learning in nuclear physics[J]. Reviews of modern physics, 2022 94(3): 031003.

18 He W B, Li Q F, Ma Y G, *et al*. Machine learning in nuclear physics at low and intermediate energies[J]. Science China Physics, Mechanics & Astronomy, 2023 66(8): 282001.

19 Pang L G. Studying high-energy nuclear physics with machine learning[J]. International Journal of Modern Physics E, 2024, 33(06): 2430009.

20 李甫鹏, 庞龙刚, 王新年. 基于机器学习的重离子碰撞中 QCD 相变的研究[J]. 核技术, 2023, 46(04): 040014-040014. DOI: 10.11889/j.0253-3219.2023.hjs.46.040014.

LI Fupeng, PANG Longgang, WANG Xinnian. Application of machine learning to the study of QCD transition in heavy ion collisions[J]. NUCLEAR TECHNIQUES, 2023, 46(04): 040014-040014. DOI: 10.11889/j.0253-3219.2023.hjs.46.040014.

21 高泽鹏，李庆峰. 利用机器学习方法对几个核物理问题的深入研究[J].核技术, 2023, 46(08): 95-102. DOI: 10.11889/j.0253-3219.2023.hjs.46.080009.

GAO Zepeng, LI Qingfeng. Studies on several problems in nuclear physics by using machine learning[J]. NUCLEAR TECHNIQUES, 2023, 46(08): 95-102. DOI: 10.11889/j.0253-3219.2023.hjs.46.080009.

22 张英逊, 方元, 李理等. 利用机器学习研究中低能重离子碰撞中的物理问题[J]. 原子能科学技术, 2023, 57(4): 751-761. DOI: 10.7538/yzk.2023.youxian.0043.

ZHANG Yingxun, WANG Fangyuan, LI Li, *et al*. Study of Physics Problem in Low-intermediate Energy Heavy Ion Collision with Machine Learning Algorithm[J]. Atomic Energy Science and Technolngy, 2023, 57(4). DOI: 10.7538/yzk.2023.youxian.0043.

23 易佳怡, 乔春源, 裴俊琛等. 贝叶斯机器学习对裂变产额的不确定度评价[J]. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2022, 52(5) : 252013-, ISSN:1674-7275. DOI: 10.1360/SSPMA-2021-0340.

YI Jiayi, QIAO Chunyuan, PEI Junchen, *et al*. Bayesian machine learning for the uncertainty evaluation of nuclear fission product yields[J]. SCIENTIA SINICA Physica, Mechanica & Astronomica, 2022, 52(5): 252013-, ISSN: 1674-7275, DOI: 10.1360/SSPMA-2021-0340.

24 韩烁冲，尚新乐，左维. 介质中有效核子-核子散射截面的深度机器学习[J]. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2022, 52(5) : 252015-, ISSN: 1674-7275. DOI: 10.1360/SSPMA-2022-0022.

HAN Shuochong, SHANG Xinle, ZUO Wei. Taming the in-medium nucleon-nucleon cross section with a deep neural network method[J]. SCIENTIA SINICA Physica, Mechanica & Astronomica, 2022, 52(5): 252015-, ISSN: 1674-7275, DOI: 10.1360/SSPMA-2022-0022.

25 Li F P, Wang Y J, Gao Z P, *et al*. Application of machine learning in the determination of impact parameter in the ^{132}Sn+^{124}Sn system. Physical Review C, 2024, 104(3): 034608.

26 Saha A, Dan D, and Sanyal S. Machine-learning model-driven prediction of the initial geometry in heavy-ion collision experiments[J]. Physical Review C, 2024, 106(1): 014901.

27 Zhang X, Liu X Q, Huang Y, *et al*. Determining impact parameters of heavy-ion collisions at low-intermediate incident energies using deep learning with convolutional neural networks[J]. Physical Review C, 2024, 105(3): 034611.

28 Wang Y J, Gao Z P, Lü H L, *et al*. Decoding the nuclear symmetry energy event-by-event in heavy-ion collisions with machine learning[J]. Physics Letters B, 2022, 835: 137508.

29 Huang Y G, Pang L G, Luo X F, *et al*. Probing criticality with deep learning in relativistic heavy-ion collisions[J]. Physics Letters B, 2022, 827: 137001.

30 Wang Y J, and Li Q F. Application of microscopic transport model in the study of nuclear equation of state from heavy ion collisions at intermediate energies[J]. Frontiers of Physics, 2020, 15(4): 44302.

31 Zhang Y X, Liu Y Y, Wang Y J, *et al*. How Do Constraints of Nuclear Symmetry Energy Reconcile with Different Models?[J]. arxiv: preprint arxiv:2301.00212 (2022).

32 Li Q F, Wang Y J, Wang X B, *et al*. Rapidity distribution of protons from the potential version of UrQMD model and the traditional coalescence afterburner. Science China Physics, Mechanics & Astronomy, 2016, 59(2): 622001.

33 Liu Y Y, Wang Y J, Cui Y, *et al*. Insights into the pion production mechanism and the symmetry energy at high density[J].

Physical Review C, 2021, 103(1): 014616.
34 Li P C, Wang Y J, Li Q F, *et al*. Effects of the in-medium nucleon-nucleon cross section on collective flow and nuclear stopping in heavy-ion collisions in the Fermi-energy domain[J]. Physical Review C, 2018, 97(4): 044620.
35 Tong L Y, Li P C, Li F P, *et al.* Nucleon effective mass splitting and density-dependent symmetry energy effects on elliptic flow in heavy ion collisions at E_{lab} = 0.09 ~ 1.5 GeV/nucleon. Chinese Physics C, 2020, 44(7): 074103.
36 Xu H J, Wang X B, Li H L, *et al*. Importance of isobar density distributions on the chiral magnetic effect search. Physical Review Letters, 2018, 121(2): 022301.
37 Xu H J, Li Z P and Song H C. High-order flow harmonics of identified hadrons in 2.76 A TeV Pb+ Pb collisions. Physical Review C, 2016, 93(6): 064905.
38 Wang Y J, Guo C C, Li Q F, *et al*. Determination of the nuclear incompressibility from the rapidity-dependent elliptic flow in heavy-ion collisions at beam energies 0.4 A﹣1.0 A GeV. Physics Letters B, 2018, 778: 207-212.
39 Xu H J, Zhao J, Wang X B, *et al*. Varying the chiral magnetic effect relative to flow in a single nucleus-nucleus collision. Chinese Physics C, 2018, 42(8): 084103.
40 Xu H J, Li H L, Wang X B, *et al*. Determine the neutron skin type by relativistic isobaric collisions. Physics Letters B, 2021, 819: 136453.
41 Li P C, Wang Y J, Li Q F, *et al*. Collective flow and nuclear stopping in heavy ion collisions in Fermi energy domain[J]. Nuclear Science and Techniques, 2018, 29: 1-8.
42 Bhalerao Rajeev S, Jaiswal A, PalBhalerao S. Collective flow in event-by-event partonic transport plus hydrodynamics hybrid approach[J]. Physical Review C, 2015, 92(1): 014903.
43 Zheng L, Liu L, Lin Z W, *et al*. Disentangling the development of collective flow in high energy proton proton collisions with a multiphase transport model[J]. The European Physical Journal C, 2024, 84(10): 1029.
44 Li P C, Wang Y J, Li Q F, *et al*. Accessing the in-medium effects on nucleon-nucleon elastic cross section with collective flows and nuclear stopping[J]. Physics Letters B, 2022, 828: 137019.
45 Keller J, Hebeler K, Schwenk A. Nuclear equation of state for arbitrary proton fraction and temperature based on chiral effective field theory and a Gaussian process emulator[J]. Physical Review L, 2023, 130(7): 072701.
46 Yuan Z Y, Bai D, Wang Z, *et al*. Reliable calculations of nuclear binding energies by the Gaussian process of machine learning[J]. Nuclear Science and Techniques, 2024, 35(6): 105.
47 Zhou S, Giulani P, Piekarewicz J, *et al*. Reexamining the proton-radius problem using constrained Gaussian processes[J]. Physical Review C, 2019, 99(5): 055202.
48 Shi S Z, Zhou K, Zhao J X, *et al*. Heavy quark potential in the quark-gluon plasma: Deep neural network meets lattice quantum chromodynamics[J]. Physical Review D, 2022, 105(1): 014017.
49 Qin F D, Luo H Y, He Z Z, *et al*. Counting of alpha particle tracks on imaging plate based on a convolutional neural network[J]. Nuclear Science and Techniques, 2023, 34(3): 37.
50 Pang L G, Zhou K, Wang X N. (2020). Deep learning for nuclear physics[J]. Nuclear Physics Review, 2020, 37(3), 720-726.
51 Andrieu C, De Freitas N, Doucet A, *et al*. An introduction to MCMC for machine learning[J]. Machine learning, 2003, 50: 5-43.
52 Baldi P, Bauer K, Eng C, *et al*. Jet substructure classification in high-energy physics with deep neural networks[J]. Physical Review D, 2016, 93(9): 094034.
53 Niu Z M, Fang J Y, and Niu Y F. Comparative study of radial basis function and Bayesian neural network approaches in nuclear mass predictions[J]. Physical Review C, 2019, 100(5): 054311.
54 Carnini M, and Pastore A. Trees and forests in nuclear physics[J]. Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics, 2020, 47(8): 082001.
55 Cai B S, Yuan C X. Random forest-based prediction of decay modes and half-lives of superheavy nuclei[J]. Nuclear Science and Techniques, 2023, 34(12), 204.
56 Reis I, Baron D, Shahaf S, *et al*. Probabilistic random forest: A machine learning algorithm for noisy data sets[J]. The Astronomical Journal, 2018, 157(1): 16.